



TECHNICKÁ UNIVERZITA V LIBERCI
Fakulta mechatroniky, informatiky
a mezioborových studií ■

POROVNÁNÍ SIMULACE TRANSPORTNĚ-REAKČNÍCH EXPERIMENTŮ DVĚMA SOFTWAREM

Bakalářská práce

Studijní program: B3918 – Aplikované vědy a informatika
Studijní obor: 3902R047 – Modelování a informatika
Autor práce: Miroslav Tomáš
Vedoucí práce: doc. Ing. Jan Šembera, Ph. D.





TECHNICAL UNIVERSITY OF LIBEREC
Faculty of Mechatronics, Informatics
and Interdisciplinary Studies ■

COMPARISON OF TRANSPORT-REACTIVE EXPERIMENT SIMULATION USING TWO SOFTWARE TOOLS

Bachelor thesis

Study programme: B3918 – Applied sciences in engineering
Study branch: 3902R047 – Modelling and Informatics
Author: Miroslav Tomáš
Supervisor: doc. Ing. Jan Šembera, Ph. D.



ZADÁNÍ BAKALÁŘSKÉ PRÁCE

(PROJEKTU, UMĚLECKÉHO DÍLA, UMĚLECKÉHO VÝKONU)

Jméno a příjmení: **Miroslav Tomáš**
Osobní číslo: **M10000124**
Studijní program: **B3918 Aplikované vědy a informatika**
Studijní obor: **Modelování a informatika**
Název tématu: **Porovnání simulace transportně-reakčních experimentů dvěma softwary**
Zadávací katedra: **Ústav mechatroniky a technické informatiky**

Z á s a d y p r o v y p r a c o v á n í :

1. Seznamte se s použitými simulačními prostředky.
2. Seznamte se s modelem kombinovaného horninového prostředí.
3. Navrhněte transportně-reakční model ve zvolených softwarech.
4. Porovnejte výsledky simulací z obou softwarů a interpretejte rozdíly.


Rozsah grafických prací: dle potřeby dokumentace
Rozsah pracovní zprávy: 30–40 stran
Forma zpracování bakalářské práce: tištěná/elektronická
Seznam odborné literatury:

- [1] Tomáš Pačes, Úvod do hydrogeochemie, Vyd. 1., Technická univerzita v Liberci, 2011, ISBN 9788073727482.
- [2] Josef Zeman, Interakce vody s atmosférou a minerály - Modelování stability přírodních anorganických systémů, 2007.
- [3] Bethke, C.M. and S. Yeakel, 2009, The Geochemist's Workbench, Version 8.0: Reactive Transport Modeling Guide. Hydrogeology Program, University of Illinois, Urbana, 106 p.
- [4] FEFLOW 6.1 - User Manual,
http://www.feflow.info/uploads/media/users_manual.pdf
- [5] Emil Vitásek, Numerické metody. Praha 1993.
- [6] Pavel Jiránek, Numerický model difúze pro model transportu látek ve spalovacím motoru, diplomová práce FM TUL, 2003.

Vedoucí bakalářské práce: doc. Ing. Jan Šembera, Ph.D.
Ústav mechatroniky a technické informatiky
Konzultant bakalářské práce: Ing. Vratislav Žabka
Ústav mechatroniky a technické informatiky
Datum zadání bakalářské práce: 10. října 2013
Termín odevzdání bakalářské práce: 16. května 2014


prof. Ing. Václav Kopecký, CSc.
děkan

L.S.


doc. Ing. Milan Kolář, CSc.
vedoucí ústavu

V Liberci dne 10. října 2013

Prohlášení

Byl jsem seznámen s tím, že na mou bakalářskou práci se plně vztahuje zákon č. 121/2000 Sb., o právu autorském, zejména § 60 – školní dílo.

Beru na vědomí, že Technická univerzita v Liberci (TUL) nezasahuje do mých autorských práv užitím mé bakalářské práce pro vnitřní potřebu TUL.

Užiji-li bakalářskou práci nebo poskytnu-li licenci k jejímu využití, jsem si vědom povinnosti informovat o této skutečnosti TUL; v tomto případě má TUL právo ode mne požadovat úhradu nákladů, které vynaložila na vytvoření díla, až do jejich skutečné výše.

Bakalářskou práci jsem vypracoval samostatně s použitím uvedené literatury a na základě konzultací s vedoucím mé bakalářské práce a konzultantem.

Datum:

Podpis:

Abstrakt

Tato práce se zaměřuje na tvorbu a porovnání modelů proudění v kombinovaném horninovém prostředí v simulačních programech. Důvod výběru tohoto tématu je přiblížení a bližší pochopení procesů, které nastávají při podzemním proudění v plně saturované zóně, a také na použití numerických postupů při jejich realizaci. Na začátku práce jsou nejprve popsány fyzikální principy a veličiny, které mají souvislost s modelovanými jevy. Dále jsou pak okrajově popsány numerické metody. Následuje popis použitých softwarů. Za kapitolou o programech je charakteristika zadání. V hlavní části se pak zaměřuje na vstupy a výstupy ze simulací. Výsledky simulací jsou pak porovnány mezi sebou.

Klíčová slova : Podzemní proudění, transport

Abstract

This thesis focuses on the creation and comparison of flow patterns in mixed geological environment in simulation programs. The reason for choosing this topic is to approach a better understanding of the processes that occur in groundwater flow in fully saturated zone. Also, the use of numerical procedures for their implementation. At the beginning, the physical principles and concepts that apply to the modeled phenomena are described. In addition, marginally described method. Numerical description of the software follows. After the chapter on programmes, the problem characterisation is presented. The main part then focuses on the inputs and outputs of the simulation. The simulation results are compared with each other.

Keywords: Groundwater flow, transport

Obsah

1	Úvod	10
2	Teorie	11
2.1	Chemie	11
2.1.1	Charakterizování roztoků	11
2.2	Chemická kinetika	11
2.2.1	Rychlost reakce	11
2.2.2	Rovnováha	12
2.2.3	Reakce rozpouštění a srážení	13
2.3	Transport	13
2.3.1	Proudění v saturované zóně	13
2.3.2	Hydraulická vodivost K a vztahy	14
2.3.3	Advekce	15
2.3.4	Hydrodynamická disperze D	15
2.3.5	Pécletovo číslo Pe	16
2.3.6	Porozita n	17
3	Simulační software	18
3.1	FEFLOW	18
3.2	Geochemist's Workbench	18
4	Formulace úloh	19
4.1	Společné prvky	19
4.1.1	Geometrie	19
4.1.2	Okrajové podmínky a počáteční podmínky	19
4.1.3	Průtok	21
4.2	Transportní část	22
4.2.1	Porovnání modelů při různých prostorových a časových diskretizacích v Geochemist's workbench a FEFLOW	22
4.2.2	Testování vlivu Pécletova čísla	27
4.2.3	Srovnání disperze a diffuse	30
4.2.4	Srovnání výpočtů s consistent mass a lumped mass (překmit)	31
4.3	Transportně-reakční část	32
4.3.1	Transport látky s rozpouštěním	32

5	Závěr	35
A	Příloha	37
B	Příloha	38

Seznam obrázků

2.1	Rozptyl koncentračního čela vlivem mechanické disperze a molekulární difuze, převzato z [5]	15
2.2	Rozptyl částic vlivem mechanické disperze a molekulární difuze, převzato z [5]	16
4.1	Geometrie úloh	19
4.2	Nastavení okrajové podmínky pro hydraulický spád	20
4.3	Vygenerované pole hydraulických výšek	20
4.4	Nastavení vstupující vody ve FEFLOW	20
4.5	Rozložení transmisivity v oblasti (červená barva odpovídá hodnotě 0,0625 [cm ² /s], fialová barva odpovídá hodnotě 0,25 [cm ² /s].)	21
4.6	Sledovací body v případě diskretizace na 500 elementů	22
4.7	Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 500 s automatickým časovým krokem	24
4.8	Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 500 se stejným časovým krokem	24
4.9	Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 2000 s automatickým časovým krokem	25
4.10	Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 2000 se stejným časovým krokem	25
4.11	Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 4500 s automatickým časovým krokem	26
4.12	Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 4500 se stejným časovým krokem	27
4.13	Graf pro Pécletova čísla	28
4.14	Graf pro Pécletova čísla	29
4.15	Graf pro Pécletova čísla	29
4.16	Průnikové křivky při změně z difuze na disperzi	30
4.17	Rozdíl mezi difusí a disperzi	31
4.18	Překmit	31
4.19	Transport se zapnutým rozpouštěním	33
4.20	Transport se zapnutým rozpouštěním ke konci	33
4.21	Transport se zapnutým rozpouštěním	34
4.22	Transport se zapnutým rozpouštěním ke konci	34

Seznam tabulek

2.1	Převládající děj v závislosti na Pécletově číslu	16
4.1	Pevný časový krok	23
4.2	Maximální časový krok	23
4.3	Poloha sledovacích bodů v [cm] ve 500 elementech	23
4.4	Poloha sledovacích bodů v [cm] ve 2000 elementech	25
4.5	Poloha sledovacích bodů v [cm] ve 4500 elementech	26
4.6	Vztah difuze a Pécletova čísla	28
4.7	Nastavení parametrů v Problem Settings ve FEFLOW	28
4.8	Parametry pro disperzi	30

1. Úvod

Na Fakultě mechatroniky, informatiky a mezioborových studií Technické univerzity v Liberci se řeší propojení simulačních softwarů FEFLOW s Geochemist's Workbench. Oba programy se dají použít pro simulaci transportu látky v podzemní vodě, i když používají jiné numerické metody. Geochemist's Workbench byl většinou používán pro modelování chemických reakcí, než pro modelování transportu látky. A FEFLOW neměl dobré řešení chemie.

Práce je členěna do tří kapitol. V první kapitole jsou popsány základní fyzikální principy, které se objevují v hydrologickém modelu. Dále zde jsou uvedeny veličiny, jež charakterují horninové prostředí a vztahy mezi nimi. Zohledněny jsou pouze vztahy popisující proudění v saturované zóně. V neposlední řadě jsou zde uvedeny pojmy z chemie.

V druhé kapitole je seznámení se simulačními programy. Jak již bylo zmíněno, jedná se o FEFLOW s Geochemist's Workbench.

Ve třetí části následuje seznámení s modely. Jedná se zde o okrajové podmínky, tvar oblasti, charakterizování hornivého prostředí. Také jsou zde ukázány vstupy a výstupy z programů. V závěru práce je vytvořena diskuze výsledků.

Cílem této práce nebylo propojení těchto programů, ale pouze testování prostředků dodané vedoucím práce a vyhodnocení získaných dat z programů a ověření zda fungují dle předpokladů.

2. Teorie

V této kapitole jsou popsány veličiny hornivového prostředí a jejich vztahy a některé pojmy a veličiny z chemie.

2.1 Chemie

2.1.1 Charakterizování roztoků

Způsobů, jak lze popsat roztok, máme několik. Většinou si určíme množství dané složky v roztoku. Jde o číselné vyjádření, které určuje složení roztoku. Jako například látková koncentrace, molalita a hmotnostní či objemové zlomky.

Látková koncentrace je definována jako poměr látkového množství dané látky a celkového objemu roztoku:

$$c_A = \frac{n_A}{V} = \frac{M_A m_A}{V}, \quad (2.1)$$

kde n_A je látkové množství složky A, M_A je molární hmotnost, m_A je hmotnost složky A a V je celkový objem vzniklého roztoku. Její jednotkou je mol/dm³.

Molalita je definována jako podíl látkového množství rozpuštěné látky na celkovou hmotnost roztoku:

$$v_A = \frac{n_A}{m_s} = \frac{m_A}{M_A m_s}, \quad (2.2)$$

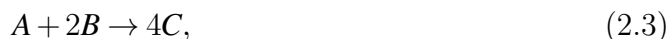
kde m_s je hmotnost rozpouštědla. Jednotkou je mol/kg.

2.2 Chemická kinetika

V chemické kinetice se zabýváme především rychlostí reakce a mechanismem reakce.

2.2.1 Rychlost reakce

Všeobecně rychlost vyjadřuje změnu nějaké veličiny za určitý čas, jako je například rychlost pohybu, průtok atd. U rychlosti reakce jde o to, jaké látkové množství reaktantů ubylo nebo produktů vzniklo za určitý časový interval. V případě chemické rovnice



lze rychlost reakce pro látku A vyjádřit jako

$$r_A = -\frac{1}{V} \frac{dn_A}{dt}. \quad (2.4)$$

Obdobně to jde vyjádřit jak pro látku B a C :

$$r_B = -\frac{1}{V} \frac{dn_B}{dt} \quad (2.5)$$

$$r_C = \frac{1}{V} \frac{dn_C}{dt}. \quad (2.6)$$

Důvodem proč ve vztahu pro látku C není znaménko mínus je, že se nachází na straně produktů. Tedy množství látky C přibývá s časem, ale množství A a B s časem ubývá z [2].

2.2.2 Rovnováha

Většina chemických reakcí neprobíhá tak, že se přemění všechny reaktanty na produkty. Výsledné množství vzniklých produktů a nezreagovaných reaktantů po nekonečně dlouhé době nazýváme rovnovážný stav reakce. Rovnovážný stav závisí na mnoha faktorech, např. stavových veličinách jako jsou tlak a teplota, na počátečním složení roztoku.

Rovnováha je definována pomocí prvního a druhého termodynamického zákona. První termodynamický zákon, někdy též zákon zachování energie, říká, že celkové množství energie je stálé. V průběhu procesů a přeměn se energie pouze přesouvá z jedné části systému do jiné, dochází k jejímu přerozdělení. Druhý zákon ukazuje, kterým směrem změny probíhají. Probíhají, tak aby celková entropie systému rostla. Entropie je měřítkem neuspořádanosti systému. Pro tyto dva zákony byly odvozeny Gibbsovy funkce, která má tu vlastnost, že nabývá minima při maximálním růstu entropie. Gibbsova funkce dává do závislosti teplotu, tlak a složení systému. Pokud by systém měl jinou hodnotu, snažil by se z tohoto stavu dostat, a to do stavu, kde je minimum Gibbsovy funkce. Tomuto stavu se pak říká rovnováha.

Při změnách teploty, často označováno jako vnější podmínky, dochází ke změně složení a to tak aby bylo dosaženo rovnováhy. V práci se především pracuje za izotermických a izobarických podmínek a výchozí složení je v rovnováze. Rovnováhu narušíme pouze změnou složení.

Rovnovážný stav (minimum Gibbsovy energie) lze za určitých podmínek popsat jednou hodnotou, tzv. rovnovážnou konstantou K (někdy též součin rozpustnosti). Pro příklad významu rovnovážné konstanty si vezměme reakci:



Pro ni K vyjadřuje rovnovážný produkt koncentrací:

$$K = \frac{[C][D]}{[A][B]}. \quad (2.8)$$

Produkt koncentrací je podíl součinů koncentrací produktů reakce dělený součinem koncentrací reaktantů, přičemž koncentrace každé látky je umocněna na příslušný stechiometrický koeficient. Pokud máme konkrétní hodnotu K , musí být u ní uveden přesný zápis chemické rovnice a též volby standardních stavů.

2.2.3 Reakce rozpouštění a srážení

Voda získává díky těmto reakcím svůj minerální obsah, nebo se ho naopak zbavuje. V těchto reakcích se vždy objeví látka v pevném skupenství. Obecně tyto reakce můžeme napsat jako



kde látka AS vstupuje jako pevná, a A^+ a S^- jsou ionty rozpuštěné látky. To v jakém poměru budou tyto ionty, když bude reakce v rovnováze nám určuje rovnovážná konstanta někdy též součin rozpustnosti.

$$K = \frac{[A^+][S^-]}{[AS(s)]}. \quad (2.10)$$

Za aktivitu čistých pevných látek dosadíme za $[AS(s)]$ jedna. Pak tato rovnice bude vypadat takto

$$K = [A^+][S^-]. \quad (2.11)$$

Abychom rozhodli zda se bude daná látka rozpouštět či srážet, je dobré si zavést index nasycenosti.

$$SI = \log \frac{Q}{K}. \quad (2.12)$$

Veličina Q představuje aktuální iontový součin. Pokud bude index nasycenosti roven 0, pak to znamená, že daná látka dosáhla rovnováhy. Protože Q a K jsou si rovny a dekadický logaritmus jedné je roven nule. Jestli bude kladný, tak je roztok vůči pevné látce nasycený a bude se srážet, pokud bude záporný, látka se bude v systému rozpouštět [1].

2.3 Transport

2.3.1 Proudění v saturované zóně

Pórový prostor je vyplněn vodou. Kapalina v porézním prostředí je popsána dvěma diferenciálními rovnicemi. První rovnice je pohybová, Darcyho zákon a druhá je bilance hmoty.

Darcyho zákon

Darcyho zákon lze zapsat takto:

$$q = -K \text{grad} \phi, \quad (2.13)$$

kde q je Darcyho rychlost, která vyjadřuje hustotu toku a někdy se nazývá „filtrační rychlost“. Koeficient hydraulické vodivosti K je závislý na materiálu i vlastnostech vodného roztoku, pokud jej užíváme ve 3D, pak s ním pracujeme jako s tenzorem. Znaménko mínus zde říká, že vodné roztoky proudí z míst vyššího tlaku do míst s nižším tlakem. Piezometrická výška ϕ vyjadřuje tlak a představuje výšku, kam by měla voda vystoupat nad daným místem. Definuje se takto:

$$\phi = z + \frac{\pi}{\rho g}. \quad (2.14)$$

Kde z je svislá souřadnice, ρ hustota a g tíhové zrychlení.

Rovnice bilance hmoty

Někdy se tato rovnice nazývá rovnice kontinuity. Rovnice vyjadřuje to, že změna hmotnosti kapaliny v zájmové oblasti musí odpovídat hmotnosti prošlé přes její hranice a to včetně výskytu zdrojů a propadů. Zápis v diferenciálním tvaru vypadá takto:

$$\frac{\partial(\rho n)}{\partial t} + \text{div}(\rho q) = P\rho. \quad (2.15)$$

Kde P je hustota zdrojů či propadů a n je porozita. Pokud nebudeme mít v oblasti žádné zdroje ani propady a budeme předpokládat, že proudění je ustálené a hustota kapaliny konstatní spolu s porozitou, pak dostaneme vztah:

$$\text{div} q = 0. \quad (2.16)$$

2.3.2 Hydraulická vodivost K a vztahy

Hydraulická vodivost K je míra schopnosti vést vodu prostředím. Často nabývá různých hodnot v různých směrech, což pro porézní prostředí obecně předpokládáme. Závisí na vlastnostech prostředí a vlastnostech kapaliny.

$$K = \frac{k\rho g}{\nu} \quad (2.17)$$

kde ρ je hustota a ν je dynamická viskozita kapaliny [kg/m/s] a k je koeficient propustnosti (viz níže).

Koeficient propustnosti k

Někdy též nazývána permeabilita. Pokud se pohybujeme v jednotkách SI pak má rozměr plochy [m²]. Ovšem často se setkáváme s jednotkou [D] darcy. Tato jednotka byla pojmenována po Henrym Darcym, který se zabýval problematikou proudění. Pro převod mezi jednotkami SI a darcy platí korelační vztah:

$$1[m^2] = 1.013249966e^{12}[D]. \quad (2.18)$$

Koeficient propustnosti není závislý na vlastnostech kapaliny ale pouze na geometrii prostředí

$$k = Cd^2. \quad (2.19)$$

kde d je střední průměr pórů a C bezrozměrná konstanta charakterující rozměr zrn.

Transmisivita

Je definována jako vlasnost prostředí, zvodně, přes které teče voda. Značíme ji T .

$$T = Kb, \quad (2.20)$$

kde b je výška kolektoru. Je zadávána v jednotkách délky na druhou za čas $[m^2/s]$.

2.3.3 Advekce

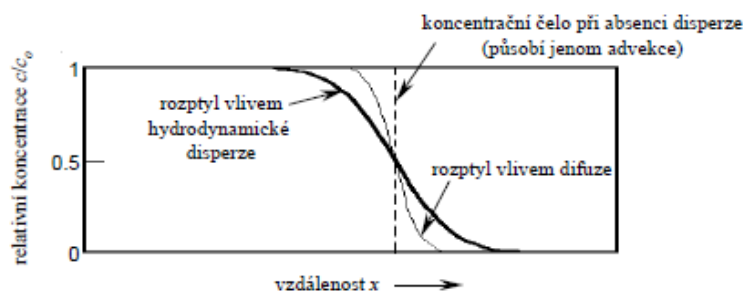
V některé literatuře ji najdeme pod pojmem konvekce. Advekcí se rozumí přenos látky vlivem pohybu celého roztoku. Advekční tok souvisí s filtrační rychlostí následujícím vztahem:

$$j_a = cq \quad (2.21)$$

kde q je Darcyovská rychlost, c je koncentrace a j_a je advekční tok.

2.3.4 Hydrodynamická disperze D

Při pohybu koncentračního mraku ve vodě, kde by byla pouze advekce, bychom viděli ostré hranice. Nicméně se zde uplatní hydrodynamická disperze. Ta sama o sobě představuje kombinaci dvou dějů a to mechanickou disperzi a molekulární difuzí.



Obrázek 2.1: Rozptyl koncentračního čela vlivem mechanické disperze a molekulární difuze, převzato z [5]

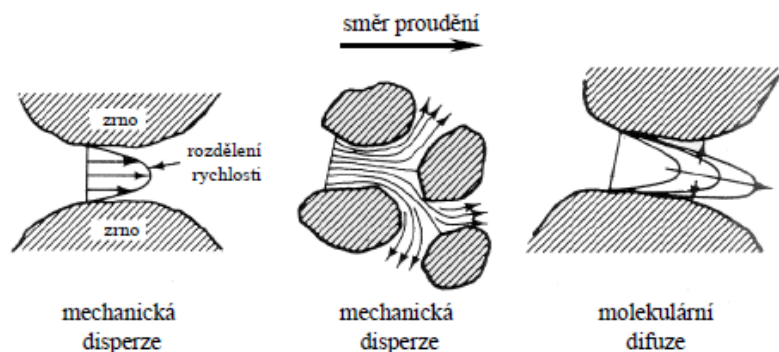
Obrázek 2.1 ukazuje výše zmíněný případ. Tyto děje dělají to, že látka z míst o vyšší koncentraci se pohybuje do míst s nižší koncentrací. Mechanická disperze D_f vzniká nehomogenitou prostředí a taky tím, že se roztok může pohybovat v pórech

různou rychlostí. Proto se často zavádí příčná α_T a podélná α_L disperzivita. Obecně pak je pak nalezneme ve vztahu:

$$D_{Tf} = \alpha_T v \quad D_{Lf} = \alpha_L v, \quad (2.22)$$

kde v je střední pórová rychlost.

Ale molekulární difuze D_m vzniká spíše přes chemické reakce, sorpci a tak dále. Situaci ukazuje obrázek 2.2.



Obrázek 2.2: Rozptyl částic vlivem mechanické disperze a molekulární difuze, převzato z [5]

Jak již bylo zmíněno hydrodynamická disperze je kombinací těchto dějů a můžeme je dát do vzorce:

$$D = D_m + D_f. \quad (2.23)$$

2.3.5 Pécletovo číslo Pe

Pécletovo číslo je podobnostní číslo. Někdy jej nalezneme jako Pécletovo difuzní kritérium. Jde o bezrozměrné číslo, které nám říká, zda v modelu proudění převládá mechanické disperze nebo molekulární difuze. Pécletovo číslo je definováno vztahem:

$$Pe = \frac{vL}{D}, \quad (2.24)$$

kde L je charakteristická délka oblasti, v charakteristická rychlost a D je charakteristický hydrodynamický disperzní koeficient.

Tabulka 2.1: Převládající děj v závislosti na Pécletově čísle

$Pe < 0,01$	převládá difúze
$0,001 < Pe < 4$	projevuje se difúze i mechanická disperze
$4 < Pe < 10^4$	oba procesy jsou zastoupeny určitým poměrem
$Pe > 10^4$	převládá mechanická disperze

2.3.6 Porozita n

Často se značí n a je bezrozměrná nebo se udává v [%], udává objem pórů v zemině či hornině.

$$n = \frac{V_v}{V} \quad (2.25)$$

3. Simulační software

Tato kapitola se věnuje simulačním programům, které v této práci byly použity.

3.1 FEFLOW

Jde o počítačový program vyvíjený a poskytovaný firmou DHI (Danish Hydraulic Institute). Software je komplex nástrojů používaný k modelování proudění podpovrchových vod, hmotnostních toků a přenosů tepla. Tyto problémy řeší metodou konečných prvků.

Metoda konečných prvků se často používá na řešení 2D a 3D problémů. Zjednodušeně popsáno se tato metoda snaží vhodnou volbou funkcí a koeficientů nahradit parciální diferenciální rovnice. Výhodou této metody je možnost použití nestrukturované sítě, která však musí sestávat z elementů pouze několika možných tvarů a nesmí obsahovat příliš zdeformované prvky. FEFLOW ve 2D pracuje s trojúhelníkovými a čtvercovými prvky.

Program komunikuje přes grafické prostředí.

3.2 Geochemist's Workbench

Geochemist's Workbench (GWB) je sada softwarových nástrojů pro řešení modelů v chemii, kde se pracuje s vodnými roztoky. Používá se pro nalezení rovnováhy chemických reakcí, sledování reakční cesty, kreslení výsledků těchto výpočtů a ukládání. Pro řešení těchto problémů používá metodu konečných objemů.

Metoda konečných objemů je velice rozšířená a často se používá k řešení 2D i 3D modelů. Základní myšlenkou této metody je rozdělení výpočtové oblasti na systém kontrolních objemů, to jest integrace výchozích diferenciálních rovnic v lokálních objemových elementech. Tyto elementy jsou určeny sítí na které je později udělán následný diferenční přepis. Výhodou této metody je to, že je použitelná na různé sítě téměř libovolného tvaru a velikosti elementů. GWB však používá 2D strukturovanou síť ve tvaru obdélníků.

Modely v GWB můžeme definovat přes příkazy nebo přes grafické prostředí.

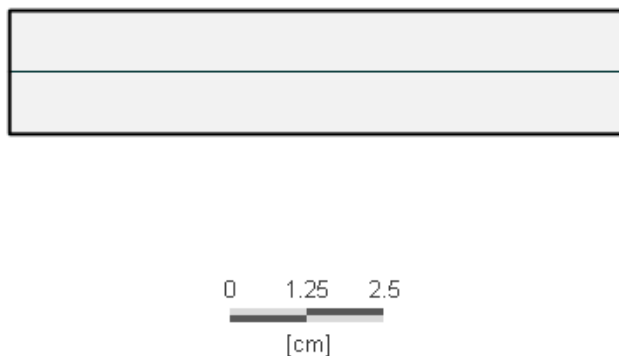
4. Formulace úloh

4.1 Společné prvky

Tato podkapitola představuje společné prvky úlohy.

4.1.1 Geometrie

Jako testovací úloha byl vybrán problém 2D proudění podél rozhraní dvou porézních prostředí s odlišnou transmisivitou. Oblast má obdélníkový tvar o rozměru 10 cm x 2 cm.

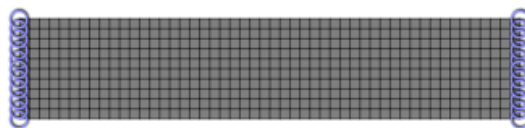


Obrázek 4.1: Geometrie úloh

Na obrázku 4.1 je vidět půlící čáru, ta je tam z důvodu lepšího ovládání vkládání parametrů.

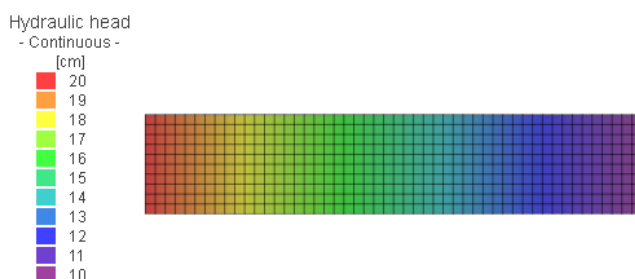
4.1.2 Okrajové podmínky a počáteční podmínky

Ustálené proudění probíhá z leva do prava, je určeno tlakovým spádem 10 cm mezi levou a pravou hranou oblasti. Horní a dolní hrany oblasti jsou nepropustné.



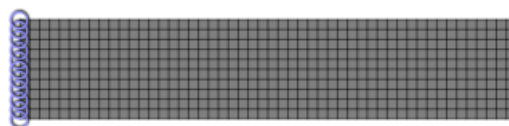
Obrázek 4.2: Nastavení okrajové podmínky pro hydraulický spád

Toto je podmínka prvního typu někdy též Dirichletova podmínka. Po vložení této podmínky si programy samy rozvrhnou s jakou změnou bude klesat tlaková výška. Můžeme jej vidět na obrázku 4.2.



Obrázek 4.3: Vygenerované pole hydraulických výšek

Budeme pozorovat transport rozpuštěné látky v prostředí. Počáteční koncentrace homogenně rozloženého vápníku je 18,91 mg/l. Tato hodnota odpovídá rovnováze roztoku s kalcitem a byla získána výpočtem v React z balíku GWB. Okrajová podmínka na vstupní hraně předepisuje koncentraci vápníku 10^{-7} mg/l, což odpovídá velmi slabě mineralizované vodě.



Obrázek 4.4: Nastavení vstupující vody ve FEFLOW

4.1.3 Průtok

Bylo potřeba nastavit průtok u obou modelů stejně. Problémem bylo, že modely vyžadovaly jiné vstupní parametry. Rovnice, které řídí průtok, vycházejí z Darcyho zákona. U FEFLOW to byla transmisivita a u GWB to byl koeficient propustnosti. Pro dodržení různosti prostředí jsme nastavili v zájmové oblasti dvě hodnoty. V horní polovině byla propustnost a transmisivita čtyřikrát větší než ve spodní polovině. Průtok je nastaven v horní polovině na $0,25 \text{ [cm}^3/\text{s}]$.

Pro GWB se průtok řídí vztahem:

$$Q = kS\nabla\phi \frac{1}{v}. \quad (4.1)$$

Kde hledáme k , ostatní proměnné známe. Za S dosadíme $1 \text{ [cm}^2]$, což odpovídá obsahu čela v horní polovině. Viskozita vody v je 10^{-3} [Pa s] a tlakový spád $\nabla\phi$ se rovná $\frac{981[\text{Pa}]}{10[\text{cm}]}$. Když tedy dosadíme do tohoto vztahu dostáváme:

$$0,25 = k1 \frac{981}{10} \frac{1}{10^{-3}}, \quad (4.2)$$

po dosazení, upravíme a dostaneme:

$$k = \frac{2,5}{981000} = 2,548e^{-6} [\text{cm}^2]. \quad (4.3)$$

Pro FEFLOW se průtok řídí vztahem:

$$Q = Tb\nabla h. \quad (4.4)$$

Zde je neznámá T . Za mocnost b dosadíme 1 [cm] a za ∇h také 1 . Potom po úpravách dostaneme:

$$T = 0,25 [\text{cm}^2/\text{s}]. \quad (4.5)$$

Ve FEFLOW po vložení parametrů se ukáže obrázek 4.5.



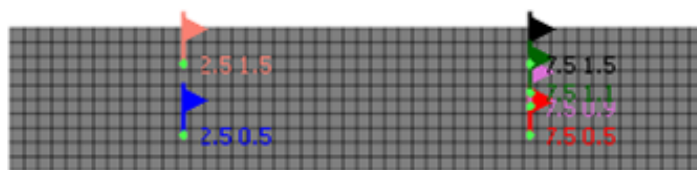
Obrázek 4.5: Rozložení transmisivity v oblasti (červená barva odpovídá hodnotě $0,0625 \text{ [cm}^2/\text{s}]$, fialová barva odpovídá hodnotě $0,25 \text{ [cm}^2/\text{s}]$.)

4.2 Transportní část

4.2.1 Porovnání modelů při různých prostorových a časových diskretizacích v Geochemist's workbench a FEFLOW

Diskretizaci výpočetní oblasti ve FEFLOW jsme provedli použitím funkce Mesh Generator s nastavením Transport Mapping s aktivní volbou Quadrilateral Mode v menu Mesh. Důvodem tohoto rozhodnutí bylo aby diskretizace ve FEFLOW byla srovnatelná s diskretizací The Geochemist's Workbench, protože GWB generuje čtvercovou síť. Použili jsme tři jemnosti diskretizační sítě 500, 2000 a 4500 elementů.

Srovnání jsme prováděli vždy v šesti sledovacích bodech, jejichž poloha se mírně lišila v závislosti na jednotlivých diskretizacích. Dva sledovací body („krajní sledovací body zleva“) vždy ležely přibližně ve vzdálenosti 2,5 cm od levé hrany a horizontálně uprostřed horní, resp. uprostřed dolní poloviny oblasti. Druhá dvojice sledovacích bodů („krajní sledovací body zprava“) ležela přibližně 2,5 cm od pravé hrany oblasti, také uprostřed horní, resp. dolní poloviny oblasti. Třetí dvojice pozorovacích bodů („sledovací body blíže k rozhraní“) ležela 2,5 cm od pravé hrany oblasti v těsné blízkosti rozhraní obou polovin oblasti. Na obrázku 4.6 je to vyobrazeno.



Obrázek 4.6: Sledovací body v případě diskretizace na 500 elementů

Sledovací body ve FEFLOW mohly být vloženy tam, kam uživatel chce aby byly u GWB to tak nešlo.

Časová diskretizace

Porovnání časové diskretizace byla provedena dvěma způsoby.

Nastavení pro „pevný časový krok“ je volby ve FEFLOW v nabídce Problem Settings, a pro GWB v záložce Config/Stepping. V následující tabulce 4.1 je uvedeno nastavení a v tabulce 4.2 je to pro „maximální časový krok“.

Tabulka 4.1: Pevný časový krok

GWB		
	DelQ	10
	Delxi	0,0005
	Courant	1
FEFLOW		
Constant time steps		
	Intial time Δt	0,01 [s]
	Number of time steps	2000

Tabulka 4.2: Maximální časový krok

GWB		
	DelQ	10
	Delxi	1
	Courant	1
FEFLOW		
Automatic time step control		
	Intial time Δt	1 [s]
	Unspecified max ratio	
	Unlimited upper bound	

Dalšími důležitými volbami, které se v případě následujících testů neměnily, jsou ve FEFLOW v Problem Settings výběr Full upwinding a Consistent mass. V obou softwarech jsou všechny koeficienty difúze a disperze nulové.

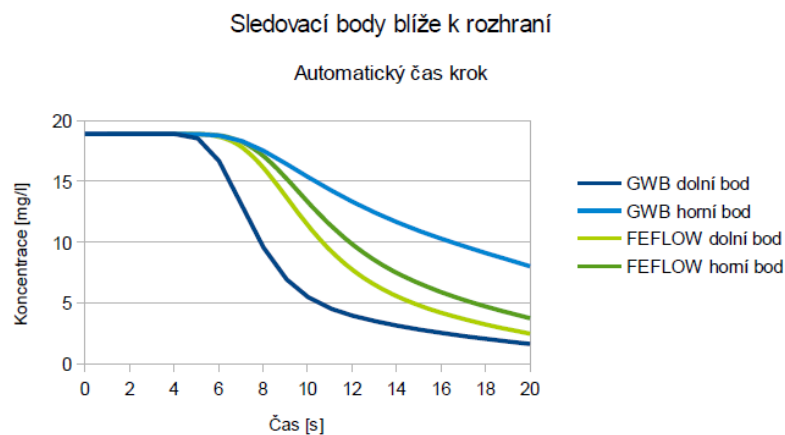
Srovnání při diskretizaci na 500 elementů

V následující tabulce 4.8 jsou uvedeny polohy sledovacích bodů, a na obrázcích 4.7, 4.8 jsou průnikové křivky jak FEFLOW tak z GWB.

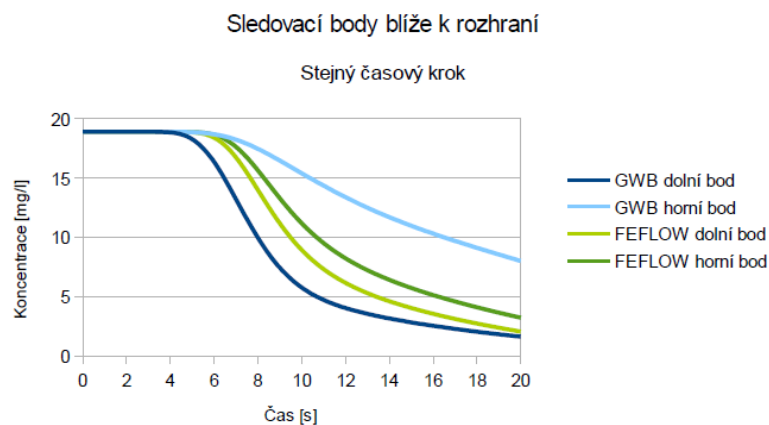
Tabulka 4.3: Poloha sledovacích bodů v [cm] ve 500 elementech

X	Y
2,5	0,5
2,5	1,5
7,5	0,5
7,5	1,5
7,5	1,1
7,5	0,9

Obrázek 4.7: Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 500 s automatickým časovým krokem



Obrázek 4.8: Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 500 se stejným časovým krokem



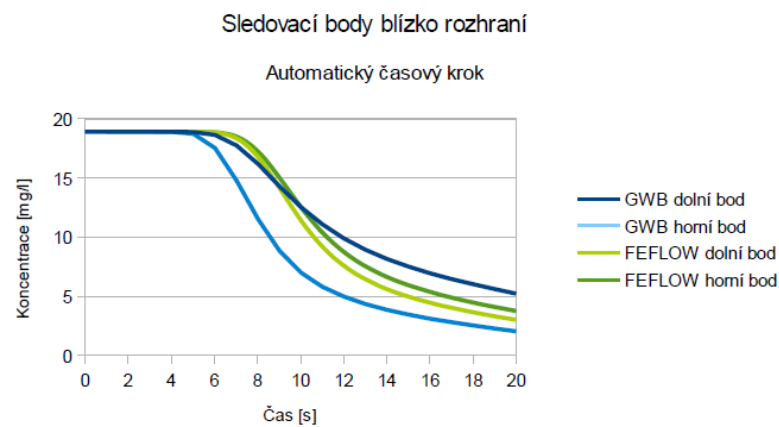
Srovnání při diskretizaci na 2000 elementů

V následující tabulce 4.4 jsou uvedeny polohy sledovacích bodů, a na obrázcích 4.9, 4.10 jsou průnikové křivky.

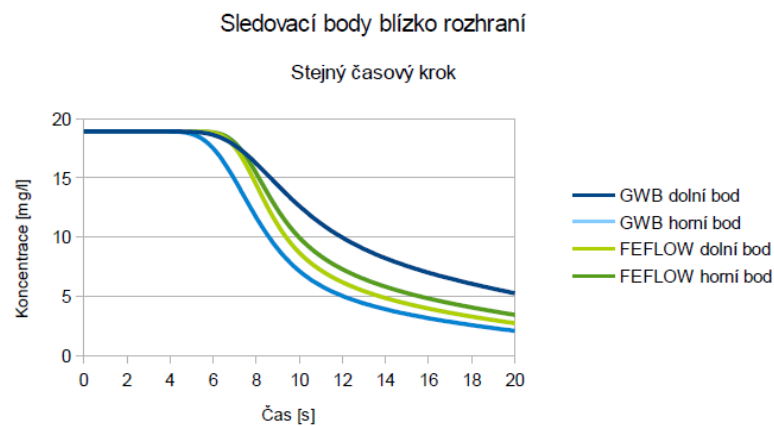
Tabulka 4.4: Poloha sledovacích bodů v [cm] ve 2000 elementech

X	Y
2,5	0,5
2,5	1,5
7,5	0,5
7,5	1,5
7,5	1,05
7,5	0,95

Obrázek 4.9: Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 2000 s automatickým časovým krokem



Obrázek 4.10: Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 2000 se stejným časovým krokem



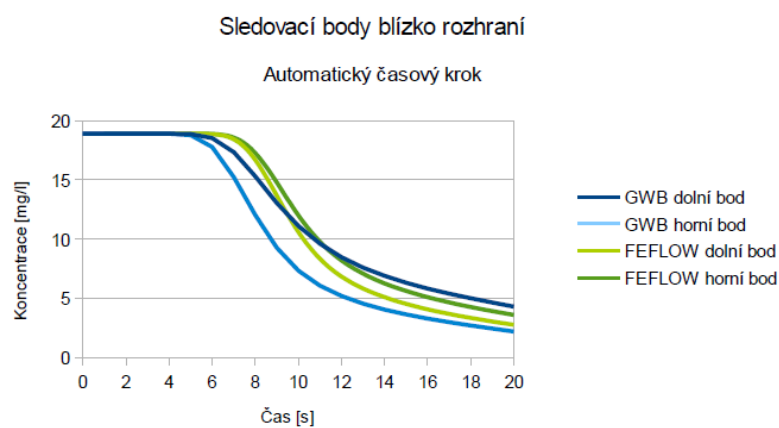
Srovnání při diskretizaci na 4500 elementů

V následující tabulce 4.5 jsou uvedeny polohy sledovacích bodů, a na obrázcích 4.11, 4.12 jsou průnikové křivky.

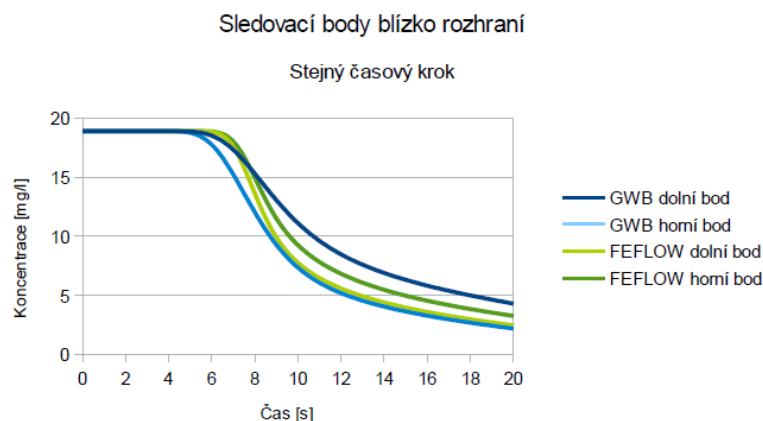
Tabulka 4.5: Poloha sledovacích bodů v [cm] ve 4500 elementech

X	Y
2,5	0,5
2,5	1,5
2 7,5	0,5
7,5	1,5
7,5	1,033
7,5	0,9667

Obrázek 4.11: Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 4500 s automatickým časovým krokem



Obrázek 4.12: Průnikové křivky na prostorové diskretizaci 4500 se stejným časovým krokem



Diskuze

Výsledky ukazují, že jemnost diskretizace má významný vliv na výsledek výpočtu. Při zjemňování sítě se výsledky získané oběma softwary vzájemně přibližují. Volba časového kroku neovlivňuje výsledky viditelně, s výjimkou zde nezobrazeného spotřebovaného výpočetního času, který je v případě maximálního časového kroku vždy výrazně menší. Výsledky v pozorovacích bodech v blízkosti rozhraní ukazují na rozdíl mezi metodou konečných objemů implementovanou v GWB a metodou konečných prvků implementovanou ve FEFLOW. V první z nich je rozhraní neprostupnější než ve druhé z nich. Je to obecně pozorovaná vlastnost odlišující tyto metody, proto byla úloha zvolena takto, abychom mohli pozorovat významnost tohoto problému. Předpokládáme, že při řešení reálných úloh se tento problém metody konečných prvků nemusí výrazně projevit, ale budeme se na něj nadále soustředit při volbě dalších testovacích úloh se zahrnutím chemických reakcí.

4.2.2 Testování vlivu Pécletova čísla

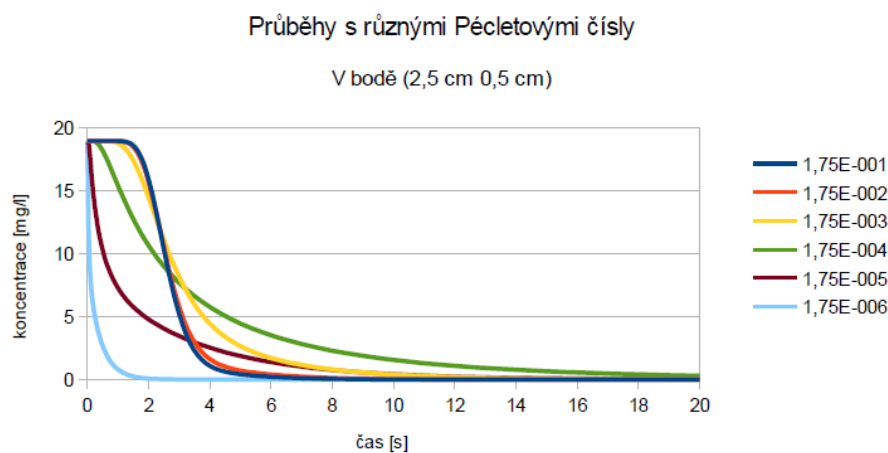
Model byl testován pouze ve FEFLOW. Pécletovo číslo vyjadřuje vztah mezi advekcí a hydrodynamickou disperzí v transportní úloze a silně ovlivňuje přesnost numerického řešení při použití různých metod. Pécletovo číslo je definováno vztahem 2.24. Za rychlost dosazujeme celkový tok oblastí $Q = 0,35 \text{ [cm}^3/\text{s]}$ vydělený průřezem výstupní stěny $S = 2 \text{ [cm}^2]$, za charakteristickou délku oblasti dosazujeme délku oblasti 10 cm.

$$v = \frac{Q}{S} \quad (4.6)$$

$$v = 0,00175 \text{ [m/s]} \quad (4.7)$$

Disperzní koeficienty jsou ve všech výpočtech nulové a hydrodynamická disperze je reprezentovaná pouze molekulární difúzí.

Obrázek 4.13: Graf pro Pécletova čísla



Následující výpočty byly prováděny s volbami parametrů, které jsou v tabulce 4.7. Také jsou v tabulce 4.6 uvedeny hodnoty difuze, které byly vkládány.

Tabulka 4.6: Vztah difuze a Pécletova čísla

$D[m^2/s]$	$Pe[-]$
0,001	$1,75e-1$
0,01	$1,75e-2$
0,1	$1,75e-3$
1	$1,75e-4$
10	$1,75e-5$
100	$1,75e-6$

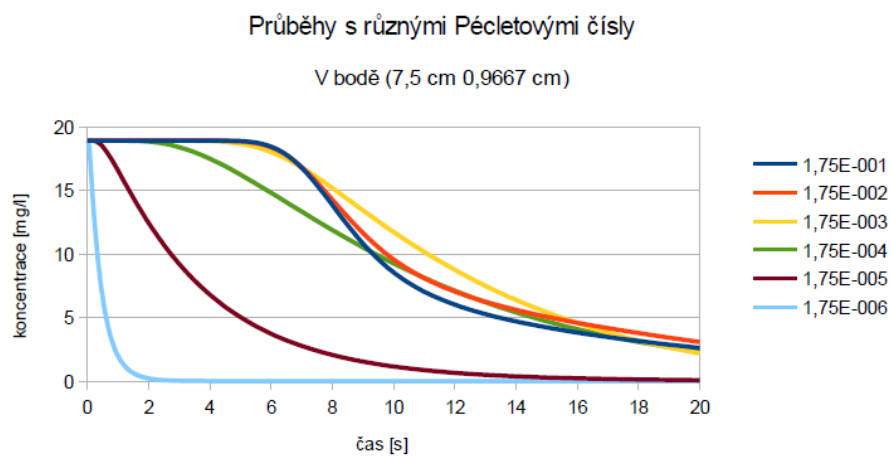
Tabulka 4.7: Nastavení parametrů v Problem Settings ve FEFLOW

Temporal properties		
	Automatic time-step control	
	Final step	20 [s]
Numerical parameters		
	Full upwind	
	Lumped mass	

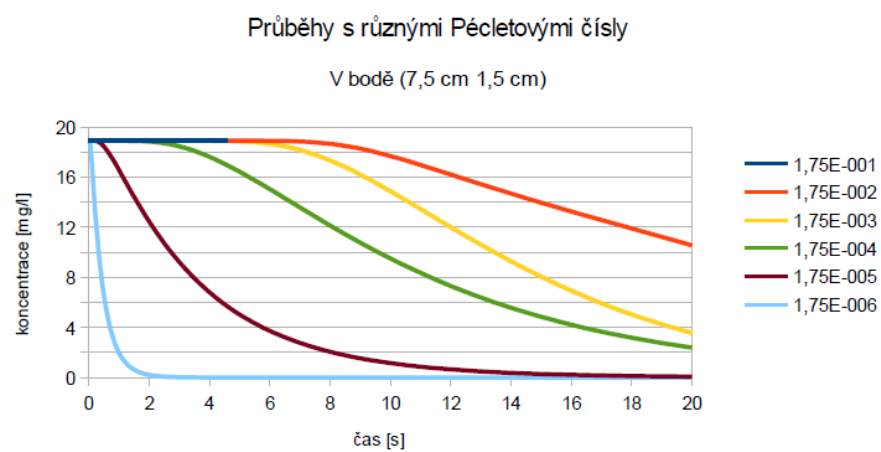
Diskuze

Pozorovaná odchylka v oblasti nízkých Pécletových čísel je způsobena volbou okrajových podmínek, která vede při velkém difúzním koeficientu k masivnímu difúznímu toku proti směru advekčního toku. Testy potvrdily možnost provádět výpočty s FEFLOW v širokém rozsahu Pécletových čísel. Důležitou pozorovanou změnou

Obrázek 4.14: Graf pro Pécletova čísla



Obrázek 4.15: Graf pro Pécletova čísla



bylo zvyšování počtu provedených časových kroků (zkracování časového kroku) při automatické volbě časového kroku při zvyšování koeficientu molekulární difuze.

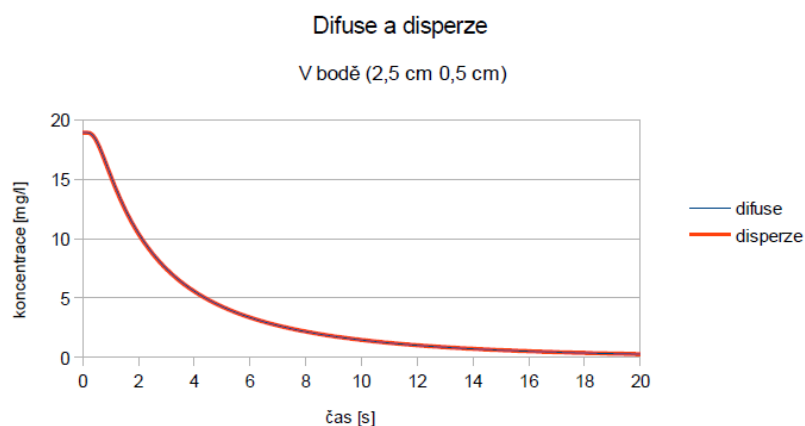
4.2.3 Srovnání disperze a difuze

Tato simulace slouží k potvrzení správnosti předpokladu, že hydrodynamickou disperzi lze reprezentovat pouze molekulární difusí. Pro jeden zvolený hydrodynamický koeficient jsme provedli výpočet s nulovou disperzí a nenulovou molekulární difusí a srovnatelný výpočet s nenulovou disperzí a nulovou molekulární difusí. V následující tabulce jsou shrnuty volby parametrů pro oba srovnatelné výpočty.

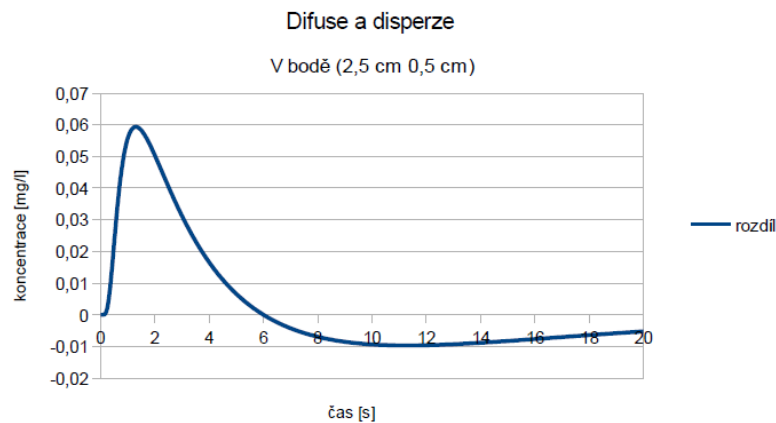
Tabulka 4.8: Parametry pro disperzi

$D = 1\text{e-}3 \text{ [m}^2/\text{s]}$		
	nahoře	dole
$v \text{ [m/s]}$	0,0025	0,01
$\alpha \text{ [m]}$	0,04	0,01

Obrázek 4.16: Průnikové křivky při změně z difuze na disperzi



Obrázek 4.17: Rozdíl mezi difusí a disperzí



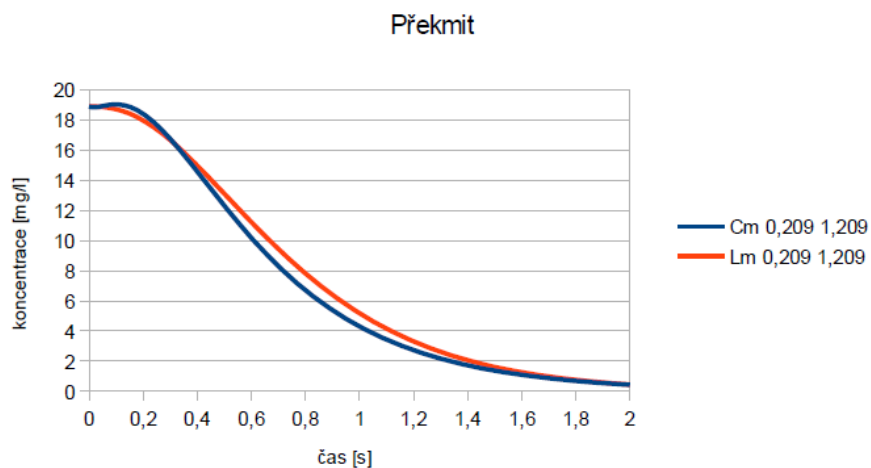
Diskuze

Pozorovaný výsledek plně potvrdil předpoklad pro předchozí testování.

4.2.4 Srovnání výpočtů s consistent mass a lumped mass (překmit)

Při nastavení volby Consistent Mass (Cm) v nabídce Problem Settings v softwaru FEFLOW se ve výsledcích simulace pravidelně objevoval překmit, který je vážným problémem při následném výpočtu chemických reakcí (zvláště, jde-li o překmit koncentrací pod nulu, ale i v případě, že se v modelu objeví nereálně vysoké koncentrace). Provedli jsme testování vlivu nastavení volby Lumped Mass (Lm), který zde ilustrujeme jedním grafem 4.18.

Obrázek 4.18: Překmit



Parametry výpočtů se liší pouze volbou v Problem Settings. Celkový čas simulace byl zkrácen na dvě vteřiny. Překmit pozorovaný ve výpočtu s Cm je ve výpočtu s Lm

potlačen, výsledek se projevuje zdánlivým zvýšením hydrodynamické disperze, což je projev numerické difúze, která fakticky tlumení překmitu zajistí. Téhož výsledku lze dosáhnout umělým zvýšením koeficientu molekulární difúze nebo disperzivity.

4.3 Transportně-reakční část

4.3.1 Transport látky s rozpouštěním

V poslední úloze se přidalo do transportu i rozpouštění. GWB pracuje s tímto vztahem:

$$\frac{dC}{dt} = MSr(1 - \frac{Q}{K}), \quad (4.8)$$

kde S je minerální povrch [cm^2/g], M je koncentrace, která se rozpouští, a r je uvedeno v manuálech jako rychlostní konstanta [$\text{mol}/\text{cm}^2/\text{s}$]. Závorky ve vzorci (4.8) určí, zda se bude látka rozpouštět nebo srážet.

Důležité je, že M je hodnota, která se sečte s hodnotou vyskytující se v záložce Initial.

Rozpouštění ve FEFLOW můžeme definovat více způsoby, které se liší podle toho jakou úlohu řešíme. Z nabízených možností žádná nevyhovovala až na použití modulu FEMATHED, kam se vloží vzorec (4.9), kterým se bude rozpouštění řídit.

$$\frac{dC}{dt} = B(1 - \frac{C}{C_0}), \quad (4.9)$$

kde B je konstanta, která by měla odpovídat součinu M , S a r . V závorkách jsou ve vzorci (4.9), je vztah určující rozpouštění či srážení. V manuálu pro FEFLOW jsme našli, že B má rozměr $\text{g}/\text{m}^3/\text{d}$.

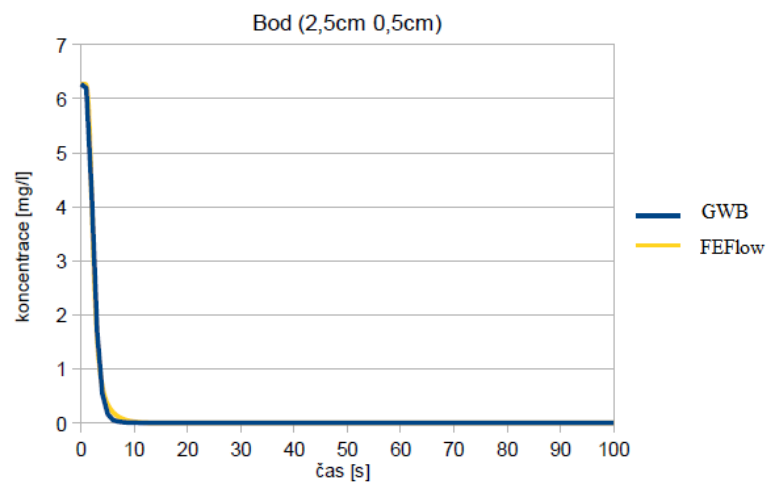
Při odhadu B jsme pak postupovali, tak že jsme dosadili M je 26 [mmol/l], S bylo 0,002 [cm^2/g] a r bylo $1\text{e-}8$ [$\text{mol}/\text{cm}^2/\text{s}$].

$$B = MSr \quad (4.10)$$

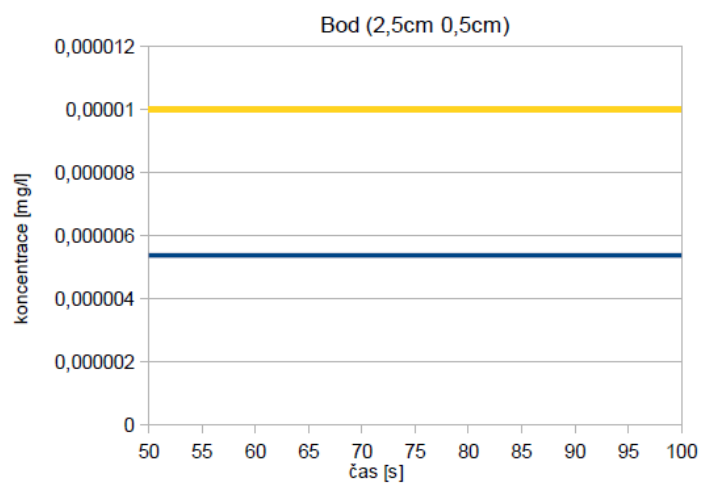
Po dosazení a správném převedení na stejné jednotky dostaneme hodnotu

$$B = 0,18[\text{g}/\text{m}^3/\text{d}]. \quad (4.11)$$

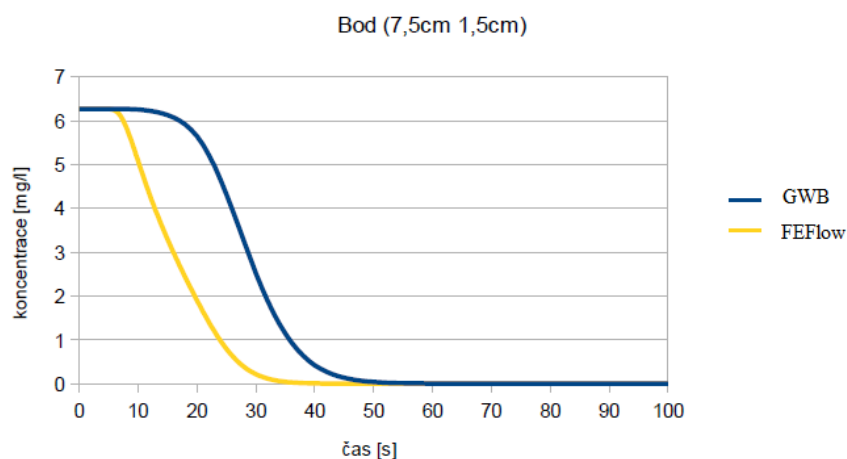
Obrázek 4.19: Transport se zapnutým rozpouštěním



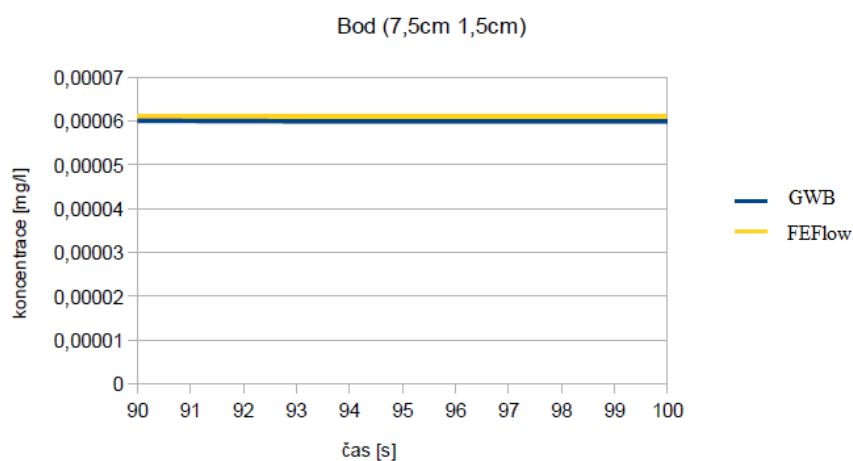
Obrázek 4.20: Transport se zapnutým rozpouštěním ke konci



Obrázek 4.21: Transport se zapnutým rozpouštěním



Obrázek 4.22: Transport se zapnutým rozpouštěním ke konci



Diskuze

Podle předpokladu měla proměnná B ze vzorce (4.9) odpovídat součinu M, S a r , ale hodnota, na které byla největší shoda, byla jiná. Hodnota, která se nakonec nejvíce blížila modelu z GWB, byla ve FEFLOW nastavena na B je $0,08 \text{ [g/m}^3\text{/d]}$. Očekávalo se, že průběhy křivek by měli odpovídat s rozdílem přidaného rozpouštění tak jako je v kapitole 4.2.1. Tedy průběhy z FEFLOW by se měli pohybovat někde mezi křivkami z GWB.

5. Závěr

Bakalářská práce se skládá ze tří částí a to z teorie, popisu softwarů a praktické části.

V teoretické části zprávy byly popsány fyzikální veličiny popisující horninové prostředí a uvedeny vztahy pro proudění podzemní vody v saturovaném prostředí a pro transport látek. Také zde byly uvedeny některé pojmy z chemie.

Dále byl uveden stručný popis simulačních softwarů.

V praktické části se provedlo několik řad testovacích výpočtů pro porovnání výsledků alternativních metod a postupů implementovaných v softwarech FEFLOW a The Geochemist's Workbench. Výsledkem je hlubší porozumění možnostem nastavení uvedených dvou softwarů a zjištění možností nastavení voleb výpočtů, které redukuje riziko potíží při propojení těchto softwarů. Pro další testování navrhuji používat ve FEFLOW vždy volbu Lumped Mass a Streamline Upwinding a co nejmenější diskretizaci prostoru.

V příloze je skript, který se používal pouze pro transport. Tento skript je jiný než skript pro rozpouštění, protože se původně zamýšlelo i různě reakční prostředí. Toho však se nedosáhlo. Důvodem zde bylo dosažení stejného prostředí v obou programech. Také to, že se zatím nedosáhlo propojení obou softwarů. Kombinovaného prostředí se tedy dosáhlo různým nastavením propustnosti.

V příloženém CD jsou jen některé modely, protože se modely od sebe lišily pouze změnou parametru, která se dala jednoduše nastavit.

Literatura

- [1] ZEMAN, Josef:
Základy geochemického modelování. Praha, 2010, 165 str.
- [2] NOVÁK, Josef:
Fyzikální chemie: bakalářský a magisterský kurz. Vyd. 1. Praha: Vydavatelství VŠCHT, 2008, 503 s. ISBN 978-80-7080-675-3.
- [3] HOKR, Milan:
Transportní procesy [online]. 2005 [cit. 2014-05-08].
http://www.nti.tul.cz/cz/images/3/3e/Hokr_TRP_skripta_05-09-23.pdf
- [4] ŘÍHA, Jakub:
Simulace zásaku a šíření železných nanočástic. TUL, 2010. Diplomová práce.
- [5] CISLEROVA, Milena a VOGEL, Tomáš:
Transportní procesy ve vadózní zóně. ČVUT: KHMKI, 2008.
- [6] Bethke, C.M. and Yeakel, S.:
The Geochemist's Workbench®. 2009, Version 9.0: Reactive Transport Modeling Guide. Hydrogeology Program, University of Illinois, Urbana, 120 p.
- [7] FEFLOW 6.1 : http://www.feflow.info/uploads/media/users_manual.pdf

A. Příloha

Obsah přiloženého CD

Modely z FEFLOW

Modely z GWB

Práce

B. Příloha

Skript z GWB

Transport látky

```
# X2t script, saved Wed Jan 23 2013 by Mirek
data = "C:\Program Files\Gwb9.0.2\Gtdata\thermo.dat" verify
time start = 0 day, end = 10 min
length = 10 cm
width = 2 cm
Ny = 4
head_drop = 10 cm
permeability = eqn \
  "IF Yposition < Width/2 THEN RETURN -5.645 ELSE RETURN -6.247" cm2 \
porosity=0 kxky = 1
porosity = .25
scope = initial
  H2O = 1 free kg
  pH = 9.2
  swap Pyrite for SO4--
  Pyrite = eqn "IF Yposition > Width/2 THEN RETURN 10 ELSE RETURN 0" mmol/l
  balance on Fe++
  Fe++ = 1e-20 mol/l
  swap O2(g) for O2(aq)
  O2(g) = -70 log fugacity
  swap Calcite for Ca++
  Calcite = eqn "IF Yposition < Width/2 THEN RETURN 26 ELSE RETURN 0" mmol/l
  swap CO2(g) for HCO3-
  CO2(g) = -5 log fugacity
scope = inlet
  H2O = 1 free kg
  balance on H+
  SO4-- = 1e-40 mmol/l
  Fe++ = 1e-40 mmol/l
  swap O2(g) for O2(aq)
  O2(g) = -8 log fugacity
```

```

Ca++      = 1e-15 mmol/l
swap CO2(g) for HCO3-
CO2(g)     = -3.5 log fugacity
suppress Goethite Hematite Magnetite
dxplot = .05 approx linear
epsilon = 5e-11
step__increase = 1000

```

Transport látky s rozpouštěním

```

# X2t script, saved Thu Mar 06 2014 by Mirek
data = "C:\ Program Files (x86)\ Gwb09\ Gtdata \ thermo.dat" verify
time start = 0 day, end = 10 min
length = 10 cm
width = 2 cm
Nx = 50
head_drop = 10 cm
permeability = eqn \
  "IF Yposition < Width/2 THEN RETURN -5.645 ELSE RETURN -6.247" cm2 \
  porosity=0 kxky = 1
porosity = .25
scope = initial
  H2O      = 1 free kg
  balance on H+
  swap O2(g) for O2(aq)
  O2(g)     = -70 log fugacity
  swap Calcite for Ca++
  Calcite    = 26 mmol/l
  swap CO2(g) for HCO3-
  CO2(g)     = -5 log fugacity
scope = inlet
  H2O      = 1 free kg
  balance on H+
  swap O2(g) for O2(aq)
  O2(g)     = -8 log fugacity
  Ca++      = 1e-15 mmol/l
  swap CO2(g) for HCO3-
  CO2(g)     = -3.5 log fugacity
kinetic Calcite rate_con = 1e-8 surface = 2e-3
suppress Goethite Hematite Magnetite
dxplot = .05 approx linear
epsilon = 5e-11
step__increase = 1000

```